生物系の数理科学 第12回

山口 諒

1 生物の模様とパターン形成：ランダムウォーク、拡散、チューリングパターン、ギーラー・マインハルト系

1.1 はじめに

シマウマの縞模様や熱帯魚の色模様、あるいは動物の皮膚上の斑点など、生物の体表に現れる模様は「どのように形づくられるのか？」という問いは古くから研究の対象となってきた。これらの現象には**拡散**や**化学反応**など、物理・化学的なプロセスが重要な役割を果たしている。以下では、まず基礎的な**ランダムウォーク**と**拡散方程式**について紹介し、そのうえで**チューリングパターン**と**ギーラー・マインハルト系**を例に、生物のパターン形成モデルの概要を解説する。

1.2 ランダムウォークと拡散

1.2.1 ランダムウォーク

1 次元を想定して、粒子が「一歩右へ進む」「一歩左へ進む」を同じ確率で繰り返すとする。時刻を離散化し、$t = 0, 1, 2, \ldots$ のタイムステップごとに移動が起きるとき、粒子の位置 X_t は

$$X_{t+1} = X_t + \Delta X_t,$$

であり、$\Delta X_t = \pm 1$ をそれぞれ確率 $\frac{1}{2}$ で選ぶ。これが **1 次元ランダムウォーク**の典型例である。ステップ数が大きくなるにつれて粒子の位置は不規則に動くが、その**平均二乗変位**はステップ数に比例して大きくなることが知られている（$\langle X_t^2 \rangle \propto t$）。

1.2.2 拡散方程式

連続時間・連続空間の極限でランダムウォークを扱うと、**拡散方程式**へ収束することが知られている。1 次元の場合、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

が典型的な拡散方程式であり、$u(x, t)$ は粒子の濃度や化学物質の濃度、$D > 0$ は拡散係数である。2 次元・3 次元へ一般化した場合も同様に、空間変数を増やして

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \nabla^2 u$$

（∇^2 はラプラシアン）を用いることで拡散現象を記述できる。

2　ランダムウォークから拡散方程式への連続極限

2.1　離散的なランダムウォークの設定

まず、最も単純な 1 次元ランダムウォークを考える。離散時間ステップを $n = 0, 1, 2, \ldots$ とし、粒子の位置を X_n とする。各ステップで粒子は

$$X_{n+1} = X_n + \Delta x_n$$

と更新され、Δx_n は確率的な変数である。たとえば

$$\Delta x_n = \begin{cases} +a, & \text{確率 } 1/2, \\ -a, & \text{確率 } 1/2, \end{cases}$$

のように「一様な距離 a だけ右に行く、左に行く」を同確率で繰り返すモデルを考える（ステップ幅 a は一定）。

2.2　粒子分布のマスター方程式

1 次元格子状に粒子が存在し、その濃度（または確率）を $p(x, n)$ と書く（時刻 n はステップ単位）。ステップ間の移動ルールが「左へ確率 1/2, 右へ確率 1/2」なら、

$$p(x, n+1) = \frac{1}{2}\, p(x-a, n) + \frac{1}{2}\, p(x+a, n).$$

これを連続変数 t で言い直すと

$$p(x, t+\Delta t) = \frac{1}{2}\, p(x-a,\ t) + \frac{1}{2}\, p(x+a,\ t).$$

ここで Δt は 1 ステップの時間、a は 1 ステップの空間変位とする。

2.3　テーラー展開で差分を微分へ

$$p(x, t+\Delta t) - p(x, t) = \frac{1}{2}\Big[p(x-a, t) + p(x+a, t)\Big] - p(x, t).$$

まず左辺を Δt で割って極限を取れば時間微分に近づく：

$$\frac{p(x, t+\Delta t) - p(x, t)}{\Delta t} \xrightarrow[\Delta t \to 0]{} \frac{\partial p}{\partial t}(x, t).$$

右辺について、$p(x \pm a, t)$ を空間についてテーラー展開する。小さい a のもとで

$$p(x+a, t) \approx p(x, t) + a\,\frac{\partial p}{\partial x}(x, t) + \frac{a^2}{2}\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x, t),$$

$$p(x-a, t) \approx p(x, t) - a\,\frac{\partial p}{\partial x}(x, t) + \frac{a^2}{2}\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x, t).$$

これらを足して 2 で割ると

$$\frac{1}{2}\big[p(x-a, t) + p(x+a, t)\big] \approx \frac{1}{2}\Big[2\,p(x, t) + a^2\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x, t)\Big] = p(x, t) + \frac{a^2}{2}\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x, t).$$

よって

$$\frac{1}{2}\Big[p(x-a,t)+p(x+a,t)\Big]-p(x,t)\approx\frac{a^2}{2}\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}.$$

これを差分方程式に代入し、さらに全体を Δt で割ると

$$\frac{p(x,t+\Delta t)-p(x,t)}{\Delta t}\;\approx\;\frac{a^2}{2\,\Delta t}\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}.$$

時間ステップ $\Delta t\to 0$ かつ空間ステップ $a\to 0$ という極限で、

$$\frac{\partial p}{\partial t}=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{a^2}{2\,\Delta t}\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}.$$

ここで $D:=\lim\limits_{\Delta t\to 0}\dfrac{a^2}{2\,\Delta t}$ と定義すれば、最終的に

$$\frac{\partial p}{\partial t}=D\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}.$$

これが**拡散方程式**（1 次元版）であり、定数 D は**拡散係数**として解釈される。

3　チューリングパターン

3.1　チューリングの仮説

イギリスの数学者アラン・チューリングは、1952 年の論文で「化学反応をしながら拡散する 2 種類以上の物質があれば、空間的なパターンが自然に形成される」可能性を示した。これは現在**チューリングパターン**と呼ばれ、動物の体表模様などへの応用が提案されてきた。

3.2　2 成分系の反応拡散方程式

もっともシンプルなチューリング型反応拡散系は、2 つの成分 $u(x,t)$, $v(x,t)$ が化学反応と拡散を同時に行う状況を想定している。たとえば

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}=F(u,v)+D_u\nabla^2 u,\\[4pt]\dfrac{\partial v}{\partial t}=G(u,v)+D_v\nabla^2 v,\end{cases}$$

ここで

- $F(u,v)$, $G(u,v)$ が 2 成分の化学反応を表す（非線形の項）。
- D_u, D_v はそれぞれの拡散係数。
- ∇^2 は空間次元に応じたラプラシアン。

平衡状態（定常解）まわりで線形化し、拡散項も含めて固有値解析を行うと、ある条件下で**空間的に一様な解**が不安定化し、斑点や縞模様などの時空間構造が生まれる。これがチューリング不安定性（拡散駆動不安定性）である。

4　ギーラー・マインハルト系 (Gierer-Meinhardt system)

4.1　例としての反応拡散モデル

チューリング以後、動物の発生過程や植物の枝形成などを説明するため、多くの反応拡散モデルが考案されてきた。その一つに、ギーラーとマインハルトによる**アクティベーター-インヒビター型**のモデルがある。物質 A を「アクティベーター（自己増幅し、他を促進する要素）」、物質 H を「インヒビター（アクティベーターの作用を抑制する要素）」と解釈し、以下のような方程式で表す。

$$\begin{cases} \dfrac{\partial A}{\partial t} = \rho \dfrac{A^2}{H} - \mu A + D_A \nabla^2 A, \\ \dfrac{\partial H}{\partial t} = \sigma A^2 - \nu H + D_H \nabla^2 H, \end{cases}$$

ここで

- ρ, σ: アクティベーター生成率に関する定数
- μ, ν: それぞれ A, H の分解率や分解速度
- D_A, D_H: 拡散係数（インヒビターの拡散がアクティベーターより大きいことが多い）

4.2　アクティベーター-インヒビターの仕組み

ギーラー・マインハルト系のポイントは

- アクティベーター A は自己増殖的な項「A^2/H」を持つ：A がある程度存在すると、さらに A の生成を促す。
- インヒビター H はアクティベーターの増殖を抑制しようとする：H が高いほど A^2/H が小さくなる。
- インヒビターの拡散が速い（$D_H > D_A$）とき、局所的に A が増えた場所で H も作られるが、H は速く広がるため、周囲では A の増加を抑えて、結果的にまだ H が追いつかない場所では A が増える——という空間的な不均一を生むメカニズムが起こる。

これによって、「斑点パターン」や「縞模様」、「迷路状パターン」など多様な模様がシミュレーションで再現される。